条件付き期待値と確率的リュウビル方程式の解法(非平衡系の物理-非平衡ゆらぎと集団挙動-,研究会報告)

金澤, 輝代士; 早川, 尚男

条件付き期待値と確率的リュウビル方程式の解法

京都大学 基礎物理学研究所　金澤輝代士[1]，早川尚男

1 Introduction & Motivation

1.1 確率微分方程式

確率微分方程式で記述された問題の標準的な解法とは、分布関数の充たすべき偏微分方程式——例えばフォッカープランク方程式——を求め、それを解く方法である。まず分布関数の充たす偏微分方程式を求める一つの解法を紹介する。但し、以下の解析では微積分学の基本定理が成り立つ自然な解釈——例えば白色ガウス過程ではストラトノビッチ解釈——のもとで行うものとする。[2]

1.2 確率的リュウビル方程式とノビコブ-ヘンギの定理

まず、確率的分布関数を $\hat{f}(x,t)=\delta(x-\hat{X}(t))$ として定義する。これは $P(x,t)=<\hat{f}(x,t)>$ を満たす。次に、確率的分布関数の満たす確率偏微分方程式である連続の式をたてる。これを確率的リュウビル方程式 [2] と呼ぶ。

$$\frac{\partial \hat{f}(x,t)}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial x}\{\dot{\hat{X}}(t)\hat{f}(x,t)\} \tag{1}$$

これの両辺の期待値を取ることでマスター方程式を得ることができる。しかし、このままではノイズと確率的分布関数の相関の項 $<\hat{\xi}(t)\hat{f}(x,t)>$ が存在して閉じた方程式にならない。そこで、キュムラント C_n と分布の空間微分で相関を展開する定理である、次のノビコブ・ヘンギの定理 [3] [4] を用いる。

$$<\hat{\xi}(t)g[\hat{\xi}]>=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int_0^t dt^n C_{n+1}(t,t_1,\dots,t_n)<\frac{\delta^n g[\hat{\xi}]}{\delta\hat{\xi}(t_1)\dots\delta\hat{\xi}(t_n)}> \tag{2}$$

この定理によれば、例えば白色ガウスノイズ駆動のランジュバン系[3]の場合、フォッカープランク方程式を得ることができる。この定理を用いた解法の問題点は、非ガウス過程では無限階微分の項が出現し、実質上ガウス過程しか解けないことである。そこで次のアプローチによってこの欠点を改善することを目指す。

---

[1] E-mail: kiyoshi@yukawa.kyoto-u.ac.jp

[2] つまり、「時間相関をもつノイズを考え、相関時間に関して連続極限を取ることで時間相関のないノイズを記述する」という立場をとる。この立場では常に微積分学の基本定理は成り立つ。例えば白色ガウス過程においてはストラトノビッチの解釈を採用することとなる。[1]

[3] $\dot{\hat{X}}=-\gamma\hat{X}+\hat{\xi}$ という確率微分方程式に従い、$<\hat{\xi}(t)>=0,<\hat{\xi}(s)\hat{\xi}(v)>=2\gamma k_B T\delta(s-v)$ という白色ガウスノイズに駆動される系

2 Formalism

2.1 条件付き期待値での表現と、色付きガウス過程での計算例

ノイズと分布関数の相関を、条件付き期待値を用いて次のようにあらわすことができる。

$$<\hat{\xi}(s)\hat{f}(x,t)>=<\hat{\xi}(s)>_{\hat{X}(t)=x}P(x,t) \tag{3}$$

つまり条件付き期待値を直接計算し、有限階の偏微分方程式を得ることができる。(3) 式を用いて色付きガウスノイズ駆動のランジュバン系[4]に対応するマスター方程式を導くと、従来のフォッカープランク型の方程式とは違う一階偏微分のマスター方程式を得ることができる。実際、初期分布を $P_{x_0}(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{(x-X_0)^2}{2\sigma^2}}$ として、条件付き期待値を汎関数積分として計算することができ、$f(t)=\int_0^t ds\int_0^t dv\phi(s,v)e^{-\gamma(t-s)}e^{-\gamma(t-v)}$ を用いて次の一階偏微分のマスター方程式を得る。

$$\frac{\partial P}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}[\gamma x-\frac{x-X_0e^{-\gamma t}}{f(t)+\sigma^2e^{-\gamma t}}(\frac{f'(t)}{2}+\gamma f(t))P] \tag{4}$$

2.2 時間相関を持たないノイズの扱い、非ガウスウィーナー過程への拡張

時間相関をもたないノイズでは、時間に関して特別な扱いが必要にある。例えば白色ガウス過程はストラトノビッチ解釈のもとでは、

$$<\xi(t)>_{\hat{X}(t)=x}\equiv\lim_{dt\to+0}\frac{1}{2}(<\xi(t)>_{\hat{X}(t+dt)=x}+<\xi(t)>_{\hat{X}(t-dt)=x})$$

を充たす。時間相関を持たないノイズでは右辺の二項は一般に違う値を示す。[5]この様な手続きを行えば、自然にデルタ極限をとった場合の計算と一致する。非ガウス過程においても同様に、条件付き期待値の適切な解釈法が必要となる。例えば、初期値が x_0 の非ガウスウィーナー過程 $\dot{\hat{X}}=\hat{\xi}$ では、時間の並進対称性を用いると $s\neq t$ の場合に、$<\hat{\xi}(s)>_{\hat{X}(t)=x}=\frac{x-x_0}{t}$ を得る。しかし分布関数の計算に必要なのは $s=t$ の場合の結果なので、上記のガウス過程の場合のように条件付き期待値を上手く解釈する方法が必要となる。その方法を現在研究中である。

参考文献

[1] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. Suppl. **69** (1980), 160.

[2] R.Kubo, J. Math. Phys. **4** (1962), 174

[3] E.A. Novikov, Soviet Phys.JETP **20** (1965), 1290

[4] P. Hänggi, Z. Physik B **31** (1978), 407.

[4] $\dot{\hat{X}}=-\gamma\hat{X}+\hat{\xi}$ という確率微分方程式に従い、$<\hat{\xi}(t)>=0, <\hat{\xi}(s)\hat{\xi}(v)>=\phi(s-v)$ を満たす色付きガウスノイズに駆動される系

[5] 例えば初期値 x_0 のウィーナー過程では、前者は $<\hat{\xi}(t)>_{\hat{X}(t+dt)=x}=\frac{x-x_0}{t}$、後者は $<\hat{\xi}(t)>_{\hat{X}(t-dt)=x}=0$ となる。